

Міністерство освіти і науки України Харківський  
національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра прикладної хімії

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Статистична термодинаміка складних систем**

За напрямом підготовки 040101 "хімія"

для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

Хімічного факультету

Кредитно-модульна система  
організації навчального процесу

Харків – 2014

Робоча програма навчальної дисципліни „Статистична термодинаміка складних систем” для студентів за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія".

Розробники: **викладач кафедри прикладної хімії Василюк Григорій Юрійович**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № 8 від “ 24 ” 04 \_\_\_\_\_ 2014 р.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ В.А. Чебанов

“ 24 ” 04 \_\_\_\_\_ 2014 р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 \_\_\_\_\_ 2014 р.

“ 14 ” \_\_\_\_\_ 05 \_\_\_\_\_ 2014 р.

Голова \_\_\_\_\_

Юрченко О.І.

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів 5	Галузь знань 0401 «Природничі науки»	заочна форма навчання дисципліна вільного вибору студента
Модулів – 2	Напрямок підготовки 040101 "хімія"	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин 159	Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"	Семестр 9 -й
		Лекції 10 год.
		Практичні 20 год.
		Самостійна робота год.
		Вид контролю: екзамен

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформувані уявлення про загальний зв'язок між мікроскопічними властивостями ізольованих атомів і молекул та термодинамічними властивостями речовин, побудованих з цих молекул; познайомити студентів з теоретичними основами сучасних методів статистичної термодинаміки.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати:** основні закони нерівноважної термодинаміки і методи їх застосування для вирішення проблем моделювання фізико-хімічних процесів.

**вміти:** проводити прості розрахунки термодинамічних властивостей речовини у рівноважному стані та інтерпретувати результати цих розрахунків.

## 3. Програма навчальної дисципліни

### Модуль I. Основи статистичної термодинаміки

Тема 1. Канонічний розподіл.

Термодинамічна імовірність. Канонічний ансамбль. Статистичне обґрунтування розподілу Больцмана. Формула Больцмана для ентропії. Функція розподілу. Зв'язок канонічного розподілу з термодинамічними потенціалами та параметрами.

Тема 2. Статистики Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.

Функції розподілу систем тотожних частинок. Вплив принципу Паулі на статистику ферміонів. Хімічний потенціал.

Тема 3 Статистична термодинаміка ідеального газу..

Молекулярна функція розподілу. Теплова, обертальна, коливальна та електронна статистичні суми ідеального газу. Розподіл Максвелла-Больцмана. Середня енергія теплового руху. Внутрішня енергія та ентропія гармонічного осцилятора. Розрахунок термодинамічних характеристик ідеального газу за молекулярними даними. Аномалія Шоттки для питомої теплоємності ідеального газу

## Модуль 2. Статистична термодинаміка взаємодіючих багаточасткових систем

Тема 4. Термодинаміка кристалічного стану.

Теплоємність кристалів. Теорії Ейнштейна і Дебая. Магнітні властивості кристалів. Закон Кюрі для парамагнетиків. Парамагнетизм Паулі. Феромагнетики та сегнетоелектрики.

Тема 5. Фазові переходи у моделі Ізінга.

Статистична термодинаміка одновимірної моделі Ізінга. Метод трансфер матриці. Фазовий перехід по полю у випадку антиферомагнітної взаємодії сусідніх спінів. Двовимірна модель Ізінга. Рішення Онзагера. Параметр порядку. Фазовий перехід порядок-безпорядок.

Тема 6. Низькотемпературна термодинаміка наноструктурованих матеріалів

Молекулярні магнетики і стабільність магнітного стану при нульовій температурі. Квантові фазові переходи. Температурні та польові залежності характеристик квазіодновимірних магнетиків.

## 4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Заочна форма					
	Усього	у тому числі				
Л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
<b>Модуль 1</b>						
Тема 1	23	2	2			19
Тема 2	25	2	4			19
Тема 3	22	1	2			19
Разом за модулем 1	70	5	8			57

<b>Модуль 2</b>						
Тема 4	30	2	4			24
Тема 5	30	2	4			24
Тема 6	29	1	4			24
Разом за модулем 2	89	5	12			72
<b>Усього годин</b>	159	10	20			129

### 6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Зв'язок канонічного розподілу з термодинамічними потенціалами та параметрами. Квантові статистичні моделі термодинамічних систем.	19	
Тема 2. Функції розподілу і хімічні потенціали систем бозонів та ферміонів.	19	
Тема 3. Обчислення молекулярної функції розподілу для ідеальних газів.	19	
Тема 4. Магнітні властивості кристалів Обчислення магнітної сприйнятливості лугових металів у газовому стані.	24	
Тема 5. Моделювання термодинаміка одновимірних решіткових моделей у методі трансфер-матриці.	24	
Тема 6. Моделювання магнітних характеристик низько розмірних сполук перехідних металів.	24	

### 7. Методи навчання

Лекції, виконання практичних робіт, самостійна робота.

### 8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, екзамен.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	70	100
Теми 1-3	Теми 4-13		
Розв'язання задач 15	Розв'язання задач 15		

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен набрати не менше 15 балів за розв'язання тестових задач.

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	<b>A</b>	відмінно
80-89	<b>B</b>	добре
70-79	<b>C</b>	
60-69	<b>D</b>	задовільно
50-59	<b>E</b>	
1-49	<b>FX</b>	незадовільно

### 10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Науково-методична література.
3. Мультимедійні презентації лекційного матеріалу.

### 11. Рекомендована література

#### Базова

1. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
2. Н.А. Смирнова Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: “Высшая школа”, 1982. – 456 с.
3. Д. Маттис Теория магнетизма. – М.: Мир, 1965. – 407 с.
4. Основи молекулярної фізики та термодинаміки : навчальний посібник / В.М. Ігнатенко . – Суми : Сумський державний університет, 2011 . – 248 с.

#### Допоміжна

1. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Классический идеальный газ. – М.: МГУ, 2006. – 44 с.
2. А.В. Леванов, Э.Е. Антипенко. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Реальные газы. Жидкости. Твердые тела. – М.: МГУ, 2006. – 44 с.
3. Р. Фейнман Статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – 408 с.
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Статистическая физика. Часть 1. – М.: Наука, 1976. –584 с.
5. G. Gallavotti Statistical mechanics. Short Treatise. – Roma, 1999. – 349 p.
6. Школа О. В. Основи термодинаміки і статистичної фізики : навч. посібник / – Донецьк : Юго-Восток, 2009. – 374 с.